

Термоэлектрические свойства бездефектных двухслойных графеновых нанолент в сильном внешнем электрическом поле

Судоргин Сергей Александрович

Волгоградский государственный аграрный университет
sergsud@mail.ru

Исследование электрофизических и термоэлектрических характеристик нового углеродного материала графена в последнее время привлекает большое внимание ученых. Вычисление его транспортных свойств и зависимости их от внешних полей является одной из наиболее важных проблем в физике углеродных низкоразмерных структур.

Представленная работа посвящена исследованию в рамках квазиклассического подхода термоэлектрических характеристик графеновых нанолент. В приближении времени релаксации получено выражение для дифференциальной термоэдс двухслойных графеновых лент во внешнем сильном электрическом поле. Двухслойный графен состоит из двух графитовых слоев с гексагональной структурой. Между двумя слоями графена приложен электростатический потенциал U . Электронная структура такой системы обычно рассматривается в рамках модели сильной связи для π -электронов в приближении ближайших соседей. Тогда закон дисперсии такой системы можно записать в виде [1]:

$$E_p^{\pm\pm}(U) = \pm \sqrt{\varepsilon_p^2 + \gamma^2 / 2 + U^4 / 4 \pm \sqrt{\gamma^4 / 4 + (\gamma^2 + U^2) \varepsilon_p^2}} \quad (1)$$

где γ ($\approx 0,4$ эВ) – величина интеграла перескока между графеновыми слоями, U – электростатический потенциал, а ε_p – дисперсионное соотношение для однослойного графена [2]

$$\varepsilon_p = \pm t_0 \sqrt{1 \pm 4 \cos(ap_x) \cos(\pi s / n) + 4 \cos^2(\pi s / n)} \quad (2)$$

где t_0 ($\approx 2,7$ эВ) – интеграл перескока электронов между соседними узлами кристаллической решетки, $a = 3b/2\hbar$, $b = 0.142$ нм – расстояние между соседними атомами углерода в графене, $\mathbf{p} = (p_x, s)$ – квазиимпульс электронов в графене, p_x – параллельная листу графена компонента квазиимпульса, $s = 1, 2, \dots, n$ – нумерует квантование компоненты импульса по ширине графенового слоя.

Из периодичности закона дисперсии следует, что его можно представить в виде ряда Фурье [3]. В рамках квазиклассического приближения функция распределения электронов $f_s(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ находится из кинетического уравнения Больцмана [4]. Интеграл столкновений выбирается в виде, используемом в τ -приближении. Можно считать, что время релаксации $\tau = \text{const}$, т.к. экспериментально установлено [5], что в графене уже при температурах порядка 40 К время релаксации постоянно и не зависит от температуры.

При постоянной концентрации электронов проводимости $n = \text{const}$ в линейном приближении по величине градиента температуры $\nabla_x T$ получено выражение для дифференциальной термоЭДС двухслойных графеновых лент во внешнем электрическом поле:

$$\begin{aligned} S(E) = & \sum_s \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\partial f}{\partial T} \sum_m A_{ms} m \sum_{m'} A_{m's} m' \left\{ \frac{E^2(m^2 + m'^2) + 1}{K(E, m, m')} * \right. \\ & * [EmR(E, m, m', p_x) + M(E, m, m', p_x)] + \\ & + \frac{E^3(m'^3 - 2m^2 m') + Em'}{K(E, m, m')} T(E, m, m', p_x) \} dp_x + \\ & + \frac{1}{\sum_s \int_{-\pi}^{\pi} f dp_x} \sum_{s'} \int_{-\pi}^{\pi} f \sum_{s''} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\partial f}{\partial T} \sum_m A_{ms} m \sum_{m'} A_{m's} m' \frac{1}{P(E, m, m')} F(E, m, m', p_{x'}, p_{x''}) dp_{x'} dp_{x''} \end{aligned} \quad (3)$$

здесь введены следующие обозначения:

$$K(E, m, m') = [E^4(m^4 + m'^4 - 2m^2 m'^2) + 2E^2(m^2 + m'^2) + 1][E^2 m^2 + 1],$$

$$P(E, m, m') = [E^2 m^2 + 1]^2 [E^2 m'^2 + 1],$$

$$\begin{aligned}
R(m, m', p_x) &= \cos(mp_x) \sin(m'p_x) + \cos(mp_x) \cos(m'p_x) - \sin(mp_x) \sin(m'p_x), \\
M(m, m', p_x) &= \sin(mp_x) \sin(m'p_x) + \sin(mp_x) \cos(m'p_x) + \cos(mp_x) \sin(m'p_x) \\
T(E, m, m', p_x) &= [\cos(mp_x) \cos(m'p_x) - Em \sin(mp_x) \cos(m'p_x)] \\
F(E, m, m', p_x) &= [\sin(m'p_x) + Em \cos(m'p_x)] * \\
&* [\sin(mp_x) + 2Em \cos(mp_x) - E^2 m^2 \sin(mp_x)]
\end{aligned}$$

где A_{ms} и $A_{m's}$ – коэффициенты разложения энергии электронов в ряд Фурье, f – функция распределения Ферми-Дирака, T – абсолютная температура.

В результате проведенного исследования предложена методика теоретического расчета коэффициента дифференциальной термоэдс двухслойных графеновых лент в присутствии электрического поля в приближении времени релаксации. Получены аналитически и проанализированы численно зависимости дифференциальной термоэдс от напряженности внешнего электрического поля для двухслойных лент различной ширины, при различных значениях электростатического потенциала между слоями графена, при различной температуре. Обнаружен нелинейный и немонотонный характер зависимости дифференциальной термоэдс от напряженности поля. При увеличении ширины двухслойных графеновых лент дифференциальная термоэдс возрастает.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-42-343001).

Список публикаций:

- [1] Yanyushkina N.N., Belonenko M.B., Lebedev N.G. // Phys. Scr. 2011. Vol. 83. P. 015603.
- [2] Харрис П. Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI века. Москва: Техносфера, 2003. 336 с.
- [3] Белоненко М.Б., Лебедев Н.Г., Демушкина Е.В. // ФТТ. 2008. Т. 50. Вып. 2. С. 367.
- [4] Шмелев Г.М., Булыгин А.С., Маглеванный И.И. // ФТТ. 1999. Т. 41. Вып. 7. С. 1314.
- [5] Гочжун Ц. Наноструктуры и наноматериалы, синтез, свойства и применение. Москва: Научный мир, 2012. 520 с.

Исследование деформации растяжения магнитной солитонной решетки при помощи просвечивающей электронной микроскопии Лоренца

Терещенко Алексей Анатольевич¹

G. W. Paterson³, S. Nakayama⁴, Y. Kousaka⁴, J. Kishine^{5,7}, S. McVitie³, A. C. Овчинников^{1,2}, И. В. Проскуряков^{6,1}, Y. Togawa⁴
¹Уральский федеральный университет, ²Институт физики металлов, ³University of Glasgow,
⁴Osaka Prefecture University, ⁵The Open University of Japan, ⁶University of Manitoba, ⁷Institute
for Molecular Science,

Овчинников Александр Сергеевич
alexey.tereshchenko@urfu.ru

Физические свойства одноосных киральных гелимагнетиков, спиральный магнитный порядок в которых обусловлен антисимметричным взаимодействием Дзялошинского-Мория – одна из активно изучаемых областей современной теории магнетизма. Одной из причин повышенного интереса к геликоидальным системам и их потенциального применения в спиновой электронике является способность управления магнитной киральностью внешними воздействиями. Так, например, совместное действие внешнего магнитного поля и механических напряжений способно приводить к значительной перестройке основного состояния магнитной солитонной решетки [1]. К сожалению, этот эффект остается малоизученным, хотя и представляет несомненный практический интерес.

Мы рассматриваем случай киральной солитонной решетки, подвергнутой одноосной упругой деформации, приложенной перпендикулярно киральной оси, и получаем путем аналитического расчета фазовую диаграмму магнитных состояний, стабильных в присутствии внешнего магнитного поля. Анизотропия, индуцированная упругой деформацией, приводит к существованию трех различных нетривиальных спиновых текстур, вид которых определяется типом деформации, и мы показываем, как эти магнитные состояния могут быть идентифицированы по их профилям сигналов, полученным при помощи просвечивающей электронной микроскопии Лоренца (ТЕМ). В работе представлены экспериментальные ТЕМ измерения контраста Френеля на деформированном образце одноосного кирального гелимагнетика CrNb₃S₆ [2], которые хорошо согласуются с рассчитанным контрастом.